

〔Heterocycles, 12, 1555 (1979)〕

## Stereochemistry of 10-Alkyl-9-arylthioxanthenium Salts

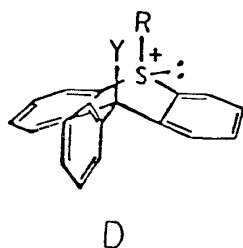
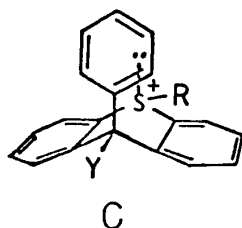
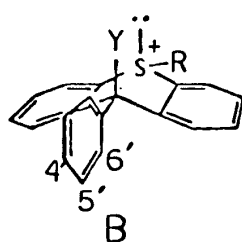
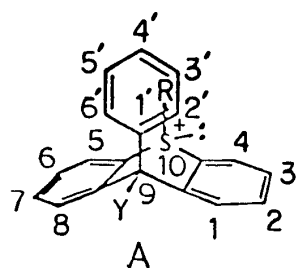
MIKIO HORI, TADASHI KATAOKA, HIROSHI SHIMIZU, SACHIO OHNO

## 10-Alkyl-9-arylthioxanthenium Salts の立体化学

堀 幹夫, 片岡 貞, 清水 洋, 大野左千雄

10-Alkyl-9-arylthioxanthenium Salts の立体異性体としては下記の A-D の4種が考えられる。いずれの異性体に属するかは、NMR スペクトルによって決定した。

9位フェニル基の立体構造は、axial なら  $H_{2,6'}$  が thioxanthene 環により高磁場シフトすること、equatorial なら  $H_{1,8}$  が高磁場シフトすることにより、また10位アルキル基については、axial なら thioxanthene 環の磁気異方性効果によって、equatorial<sup>2</sup>の場合より高磁場に吸収が現われることから決定した。



| Compd No. | R <sup>1</sup>                | R <sup>2</sup>                        | R <sup>3</sup> | X <sup>1</sup> | X <sup>2</sup>  | preferred conformation |
|-----------|-------------------------------|---------------------------------------|----------------|----------------|-----------------|------------------------|
| 1         | H                             | Ph                                    | H              | -:             | Me              | A                      |
| 2         | Ph                            | H                                     | H              | -:             | Me              | D                      |
| 3         | H                             | Ph                                    | 4-Me           | -:             | Me              | A                      |
| 4         | Me                            | Ph                                    | H              | -:             | Me              | A                      |
| 5         | Me                            | Ph                                    | H              | Me             | -:              | C                      |
| 6         | Me                            | Ph                                    | H              | -:             | Et              | A                      |
| 7         | Ph                            | Me                                    | H              | -:             | Et              | D                      |
| 8         | Ph                            | Pr <sup>1</sup>                       | H              | Me             | -:              | B                      |
| 9         | Ph                            | CH <sub>2</sub> ————— CH <sub>2</sub> |                | -:             | CH <sub>2</sub> | D                      |
| 10        | Mes                           | H                                     | H              | -:             | Me              | D                      |
| 11        | Mes                           | H                                     | 3-Me           | -:             | Me              | D                      |
| 12        | Mes                           | H                                     | 3-Me           | Me             | -:              | B                      |
| 13        | Dur                           | H                                     | H              | -:             | Me              | D                      |
| 14        | Dur                           | H                                     | 4-Me           | -:             | Me              | D                      |
| 15        | H                             | C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>         | H              | Me             | -:              | C                      |
| 16        | C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> | H                                     | H              | Me             | -:              | B                      |

